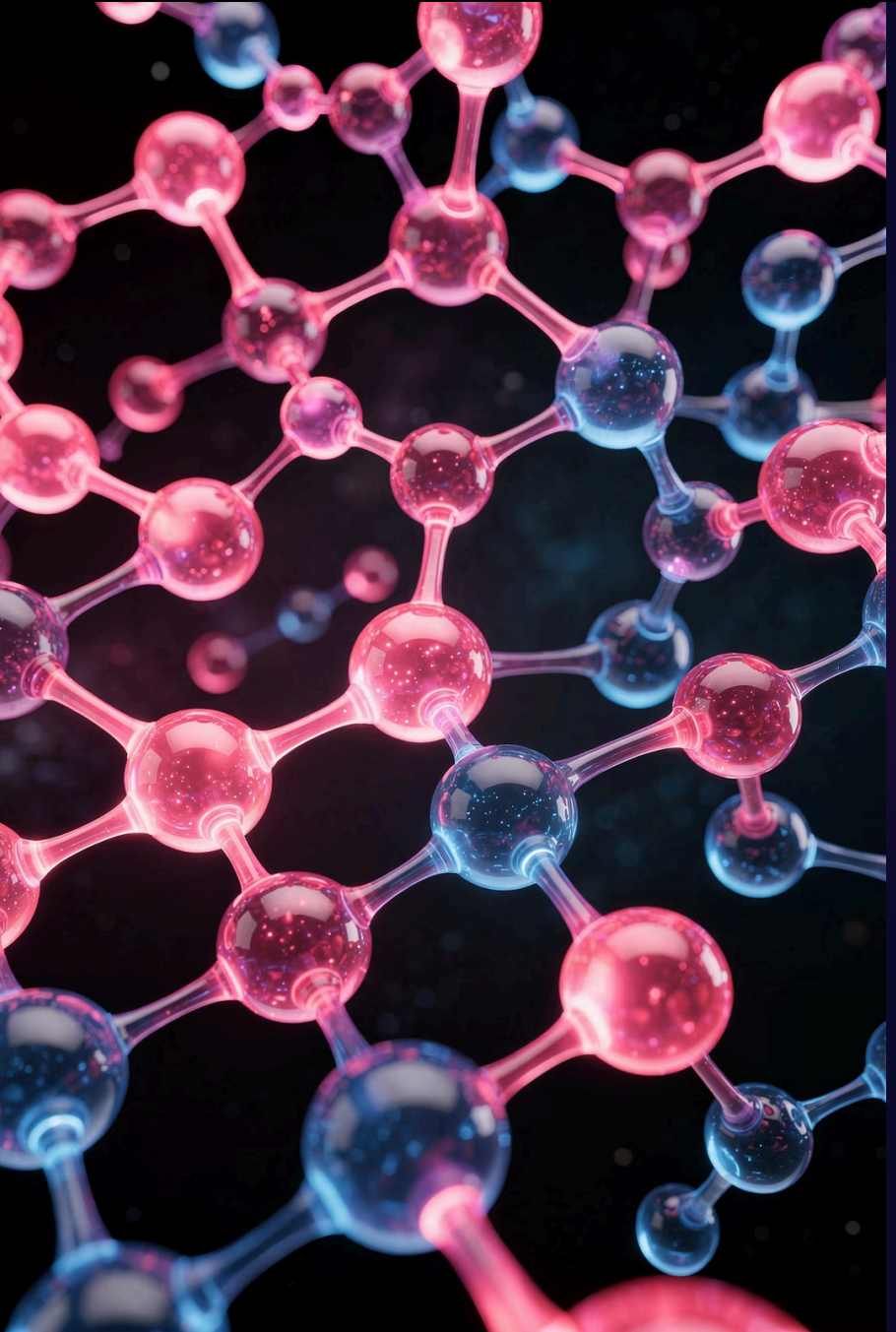


# Lewis Yapıları, Formal Yük ve Moleküler Mimari

Ders Sunumu

*Teradigma*

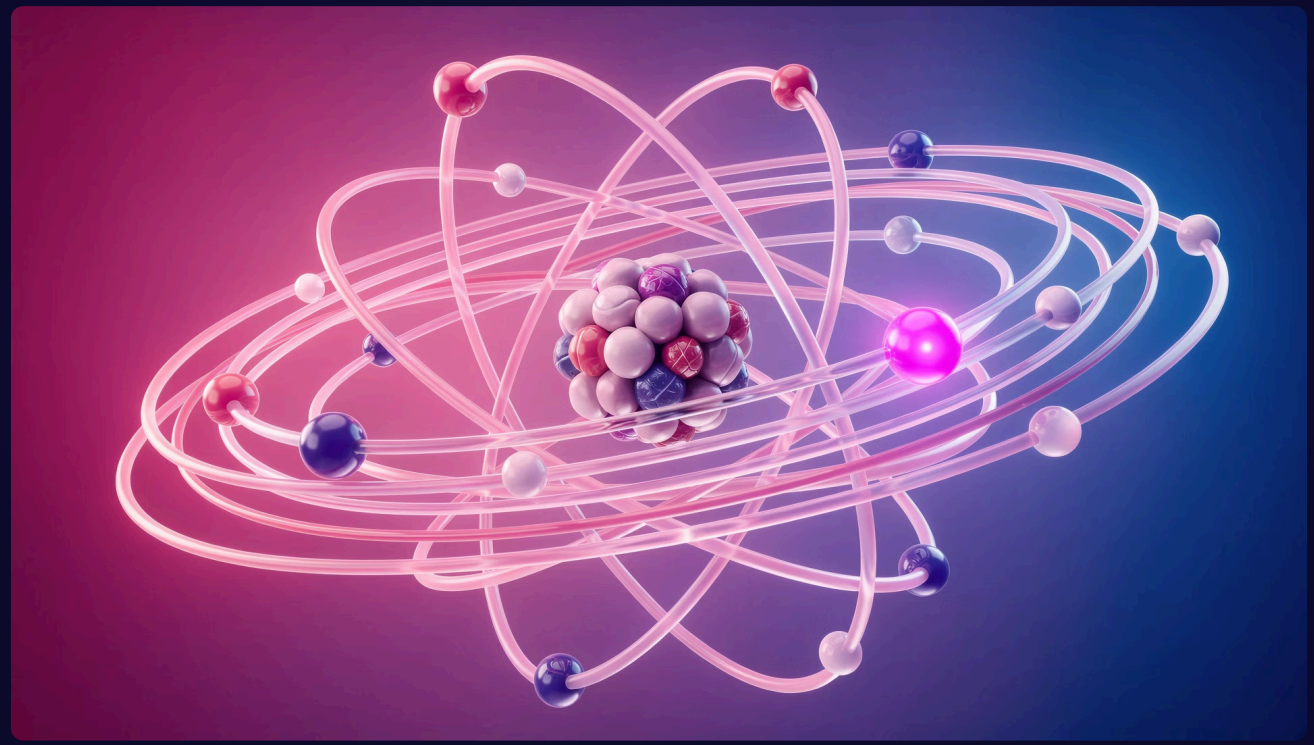
# Maddenin Dili: Neden Lewis Yapıları?

Atomlar arasındaki bağlar olmasa evren, birbirine çarptıkça seken asal gazlardan oluşan cansız bir toz bulutu olurdu.

- Kimyasal bağlar, maddenin çeşitliliğini ve yaşamı mümkün kılan görünmez ipliktir
- Lewis yapıları, bu bağların iki boyutlu topolojik haritasıdır
- 1916'dan bu yana geçerliliğini koruyan bu model, modern ilaç tasarımından nanoteknolojiye kadar teknolojinin kalbinde yer alır

> 🤔 Kağıt üzerindeki birkaç nokta ve çizgi, gerçekte bir kuantum mekaniksel dengeyi nasıl temsil edebilir?

# Değerlik Elektronu ve Oktet Kuralı



Atomlar kimyasal bağ oluştururken en dış yörüngedeki **değerlik elektronlarını** kullanırlar.

- Bağlanma amacı: sistemin potansiyel enerjisini düşürmek, termodinamik olarak en kararlı hale ulaşmak
- Oktet kuralı: atomlar, soy gaz yapısını andıran 8 elektrona ulaşmaya sevk edilirler
- 8 elektron, küresel simetrik yük dağılımı ve düşük enerjili kuantum durumu sağlar

> 🤔 Bir atom "kararlı olmak ister" diyebilir miyiz? Bir taş havaya atılınca yere düşer; bu, taşın yerçekimini "bildiği" anlamına gelir mi?

# Lewis Yapısının Üç Sembolü

Lewis yapısında üç farklı gösterim unsuru birbiriyle derin bir anlam taşır.

## Element Sembolü

Çekirdeği ve iç katman elektronlarını temsil eder

## Noktalar

Bağ yapmayan, atomun üzerinde kalan ortaklanmamış elektron çiftlerini gösterir

## Çizgiler

İki atom arasında paylaşılan elektron çiftlerini, yani kovalent bağları simgeler

# Lewis Yapılarının Gücü: Su ve Amonyak

Bu statik çizimler, moleküllerin neden belirli geometrilere sahip olduğunu açıklar.

## Su ($H_2O$)

Oksijen üzerindeki iki ortaklanmamış çift, bağ açısını 104,5 dereceye büker → "V" şekli

## Amonyak ($NH_3$)

Azot üzerindeki tek ortaklanmamış çift, moleküle piramidal yapı kazandırır

## Gerçek Temsil

Bu çizimler, elektron bulutlarının örtüşmesiyle oluşan dinamik bir dengeyi temsil eder

# Formal Yük: Moleküler Muhasebe

Birden fazla geçerli Lewis yapısı çizilebildiğinde, hangisinin daha kararlı olduğunu belirlemek için **formal yük** hesabı yapılır.

Formal Yük (FY) = V − (N + ½B)

- **V** = Atomun serbest haldeki değerlik elektron sayısı (grup numarası)
- **N** = Ortaklanmamış (bağ yapmayan) elektron sayısı
- **B** = Bağ yapımında kullanılan elektron sayısı

Bu hesaplama, elektronların bağlarda eşit paylaşıldığı varsayımına dayanır.

# Kararlılığın Üç Altın Kuralı — 1

## Sıfır Yük Prensibi

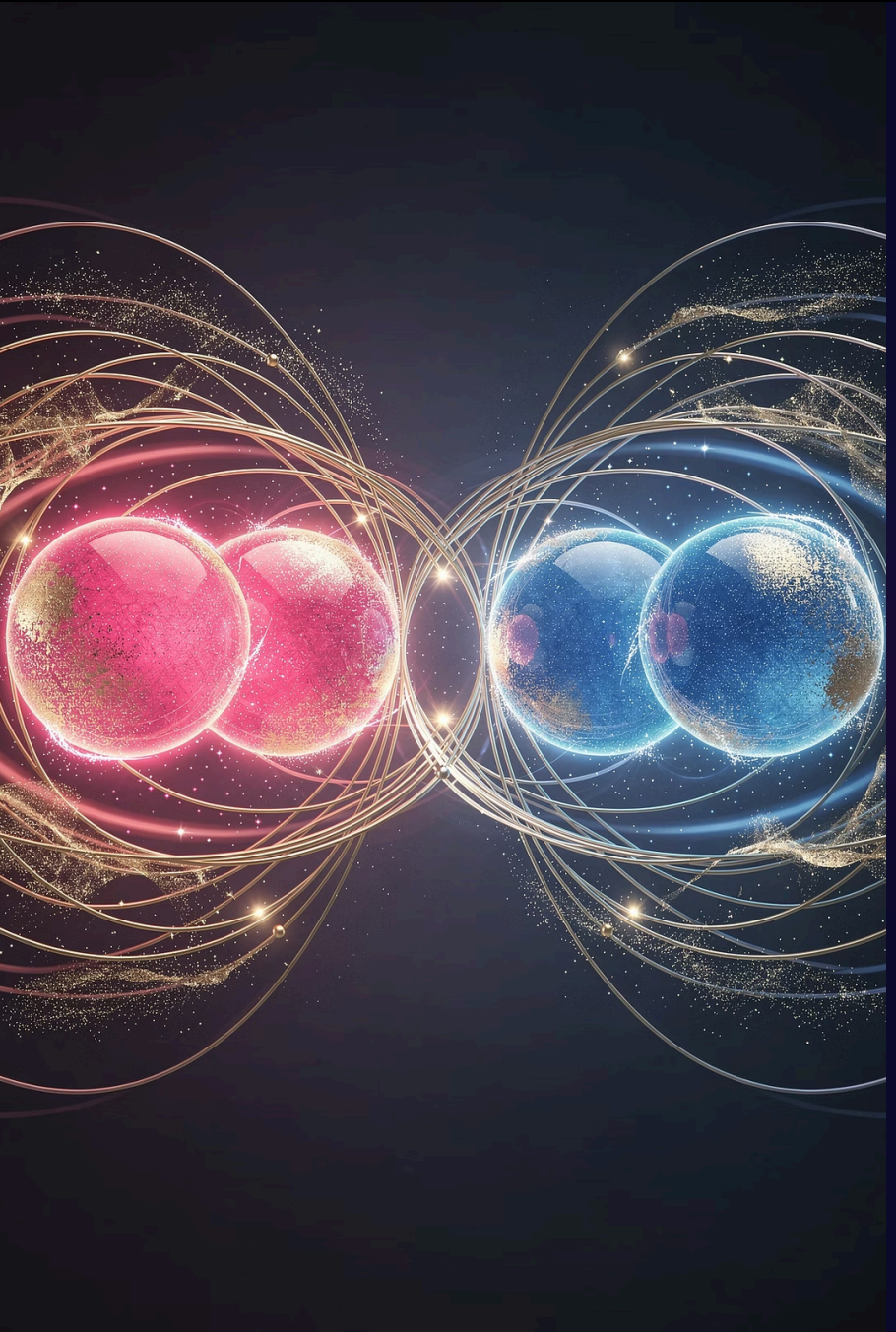
En kararlı Lewis yapısı, formal yüklerin sıfır veya sıfıra en yakın olduğu yapıdır.

- Atomlar, üzerlerinde fazladan yük taşımak yerine nötr kalmaya sevk edilir
- Bu, enerjinin en düşük, gerilimin en az olduğu durumdur

## Elektronegatiflik Uyumu

Kaçınılmaz bir formal yük oluşacaksa negatif yük, elektronegatifliği yüksek atoma verilmelidir.

- Oksijen veya flor üzerinde negatif yük → kararlı
- Oksijen üzerinde +1, karbon üzerinde −1 → kararsız, "eşyanın tabiatına" aykırı



# Kararlılığın Üç Altın Kuralı — 2

**Yük Ayrışımının Minimizasyonu:** Komşu atomlar üzerinde aynı işaretli formal yükler yapıyı kararsız kılar.

### (+) ve (+) Komşuluk

Güçlü elektrostatik itme → parçalanma eğilimi

### (−) ve (+) Komşuluk

Çekim → kararlılık

> 🤔 Cansız atomların bu "adalet" dengesini kendi iradeleriyle mi kurduklarını, yoksa onları bu dengeye sevk eden bir tasarımın mı işlediğini sorgulamak bilimsel bir meraktır.

# Elementlerin Rolü ve Formal Yük Uyumu

Her elementin bağ yapma kapasitesi, evrendeki işleviyle örtüşecek biçimde tasarlanmıştır.

## Karbon (C)

4 bağ, 0 ortaklanmamış çift → yaşamın iskeletini oluşturan sonsuz zincirler ve halkalar kurulabilir

## Azot (N)

3 bağ, 1 çift → hem peptit bağı kurar hem de hidrojen bağlarıyla üç boyutlu katlanmaya zemin hazırlar

## Oksijen (O)

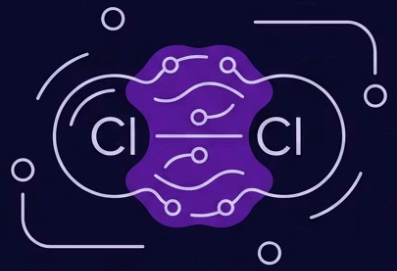
2 bağ, 2 çift → suyu kutuplu ve "kırık V" şeklinde kılan yapı

## Flor (F)

1 bağ, 3 çift → reaktiviteyi sınırlar, moleküllerin uç noktalarını belirler

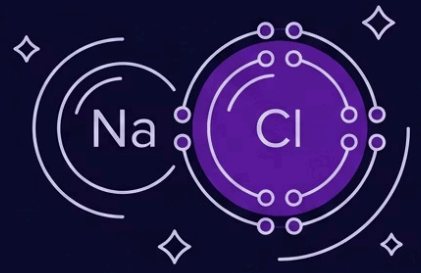
# Formal Yük ile Yükseltgenme Basamağı Arasındaki Fark

## Formal Yük




**Kovalent Karakter Vurgusu. Elektronlar atomlar arasında eşit paylaşılır.**

## Yükseltgenme Basamağı




**İyonik Karakter Vurgusu. Tüm bağ elektronları elektronegatif atomdadır.**

**Gerçeklik bu iki uç arasındadır.**

Bu iki kavram elektronların dağılımını inceler; ancak bakış açıları farklıdır.

- **Formal Yük** → elektronlar atomlar arasında eşit paylaşılır varsayımı (kovalent karakter vurgusu)
- **Yükseltgenme Basamağı** → tüm bağ elektronları elektronegatif atoma ait varsayımı (iyonik karakter vurgusu)
- Gerçek elektron dağılımı bu iki uç noktanın arasındadır

ⓘ Formal yük molekülün geometrisini ve reaktivitesini anlamada, yükseltgenme basamağı ise redoks tepkimelerini takip etmede kullanılır.

# Rezonans: Tek Bir Çizimin Anlatamadığı Gerçeklik

Ozon ($O_3$) ve benzen ($C_6H_6$) gibi moleküllerde deneysel veriler, bağ uzunluklarının eşit olduğunu gösterir; oysa tek bir Lewis yapısı bunu ifade edemez.

## 1 Rezonans Hibriti

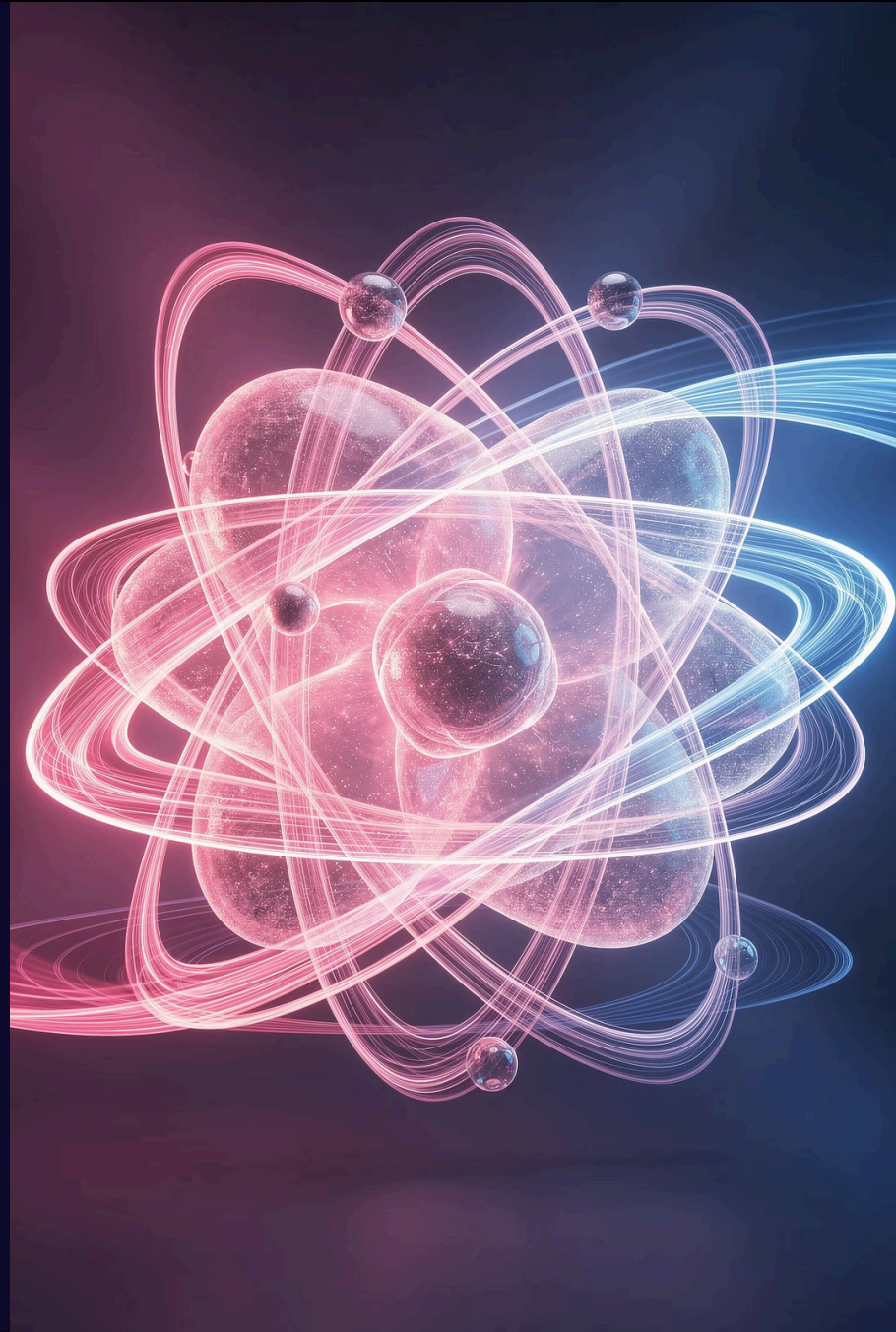
Gerçek elektronik yapı, tüm geçerli Lewis formlarının ağırlıklı ortalaması (hibriti)

## 2 Tek Kuantum Durumu

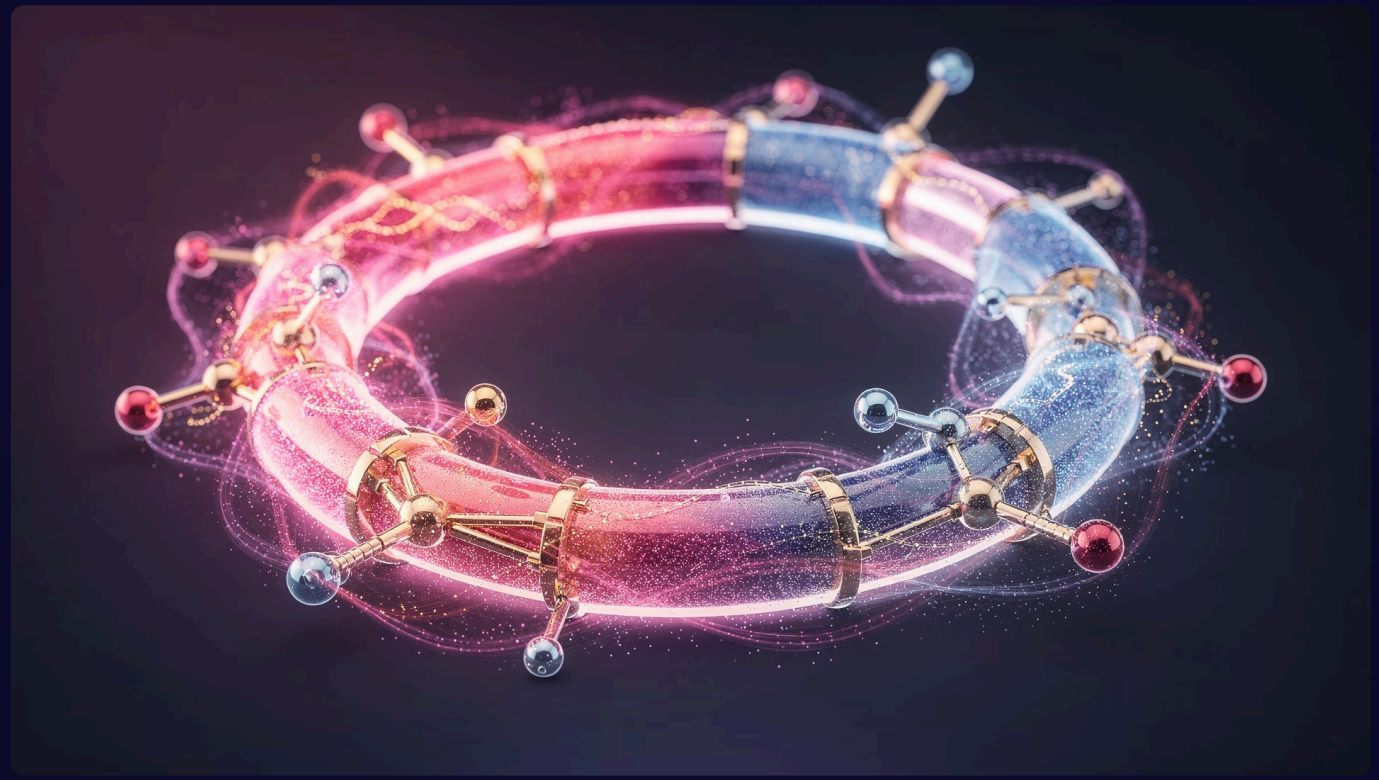
Molekül, formlar arasında gidip gelmez; hepsinin özelliklerini aynı anda taşıyan tek ve kararlı bir kuantum durumundadır

## 3 Özgün Varlık

Bu durum, bir gergedanın "tek boynuzlu at ile ejderhanın karışımı" değil, kendine has bir varlık olmasına benzer



# Delokalizasyon: Yükü Paylaşmanın Hikmeti



Rezonans, elektronların tek bir bağa hapsolmayıp molekülün geneline yayılması (delokalizasyon) anlamına gelir.

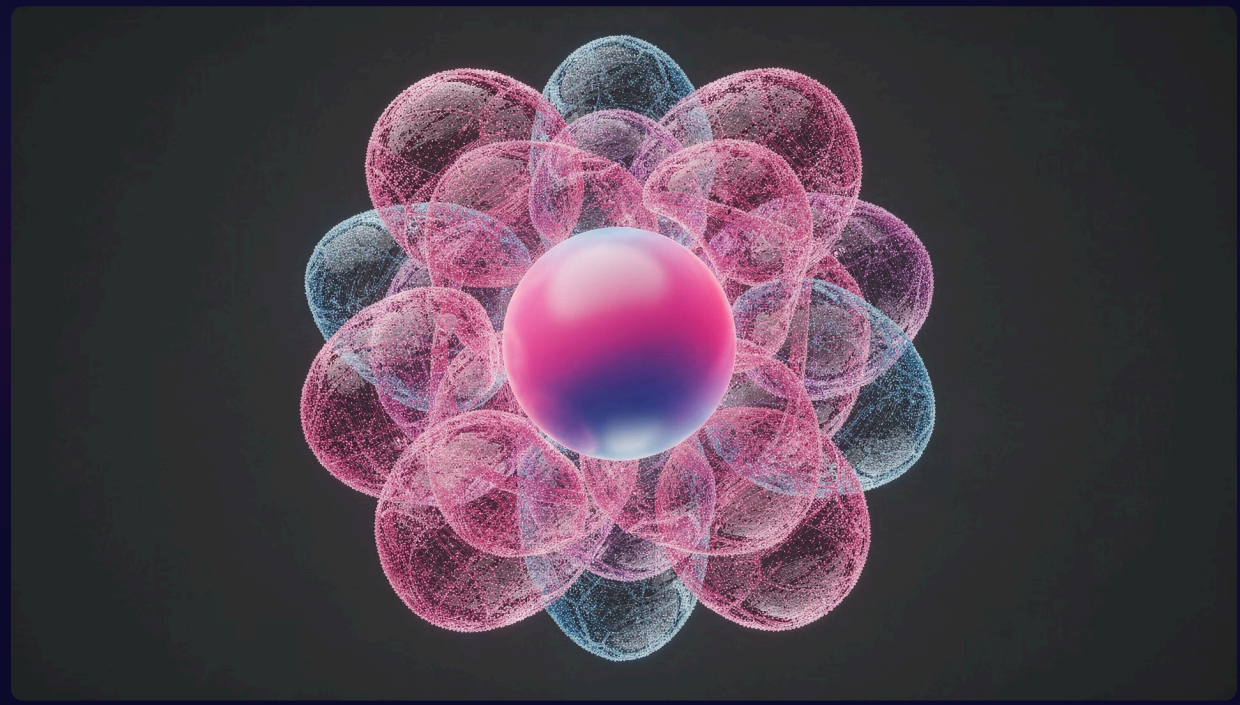
- Elektronların geniş alana yayılması kinetik enerjilerini düşürür → **rezonans enerjisi** adı verilen ekstra kararlılık kazanılır
- Benzen halkasındaki bu yayılma, DNA bazlarında da görülür ve genetik bilgiyi ultraviyole ışınlarına karşı korur
- Yük, tek bir atomun üzerine yüklenmez; tüm yapı tarafından paylaşılır

# Hipervalens: Oktet Kuralının Ötesi

3. periyot ve sonrasındaki elementler (P, S, Cl) zaman zaman 8'den fazla elektrona sahip olabilir.

- $PCl_5$ → merkez fosfor atomu 10 elektron
- $SF_6$ → merkez kükürt atomu 12 elektron
- Güncel kuantum kimyasal hesaplamalar (2015–2025): bu durumun boş d-orbitalleriyle değil, çok merkezli bağlar ve iyonik rezonans yapılarının katkısıyla (3-merkez-4-elektron bağları) açıklandığını göstermektedir

⚠ Lewis yapıları güçlü bir yaklaşımdır; nihai hakikat, kuantum mekaniğinin derinliklerindeki elektron yoğunluğu dağılımıdır.



# Suyun 104,5 Derecelik İnce Ayarı

Oksijen sp3 hibritleşmesi yapar; iki bağlayıcı ve iki ortaklanmamış elektron çifti oluşur. Ortaklanmamış çiftlerin daha güçlü itmesi ideal 109,5 dereceyi **104,5 dereceye** büker.

### Evrensel Çözücü

Bu açı olmasa su kutupluluğunu büyük ölçüde yitirirdi → evrensel çözücü özelliği ortadan kalkardı

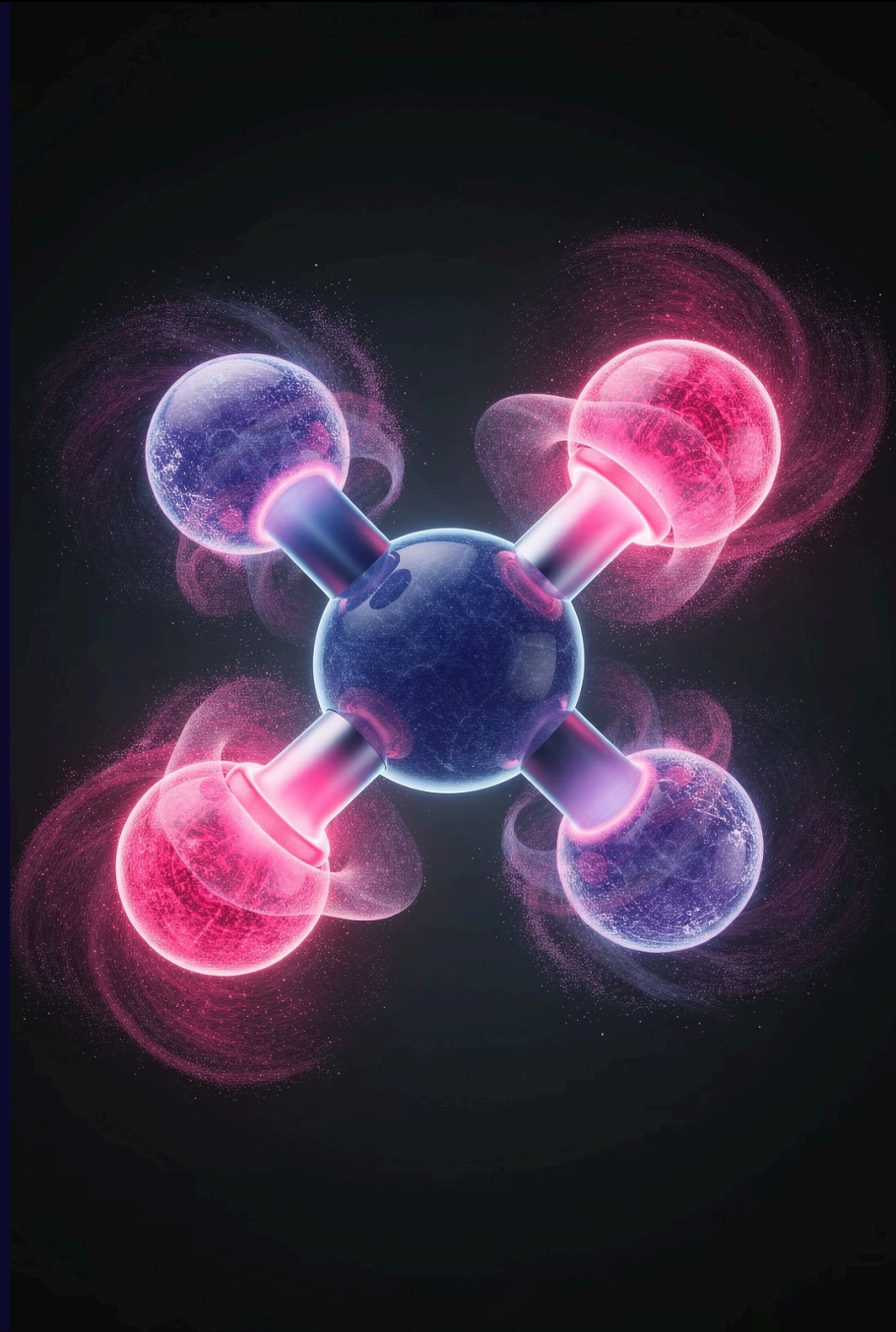
### Hidrojen Bağları

Hidrojen bağları oluşamazdı → su oda sıcaklığında gaz olurdu

### Okyanuslar

Buz, sıvı sudan yoğun olurdu → okyanuslar dipten donar, su altı yaşamı yok olurdu

> Kardeş molekül $H_2S$'in bağ açısı 92 derecedir. Bu küçük fark, $H_2S$'i yaşam kaynağı değil, zehirli bir gaz yapar. Birkaç derecelik fark, "yaşam kaynağı" ile "zehirli gaz" arasındaki uçurumu belirler.



# Beliriş (Emergence): Parçaların Ötesindeki Bütün

Sodyum Klorür (NaCl) — sofra tuzu — bu olgunun en çarpıcı örneğidir.

1

### Sodyum (Na)

Suyla temas ettiğinde patlayan, son derece reaktif metal

2

### Klor (Cl)

Birinci Dünya Savaşı'nda kimyasal silah olarak kullanılmış, boğucu gaz

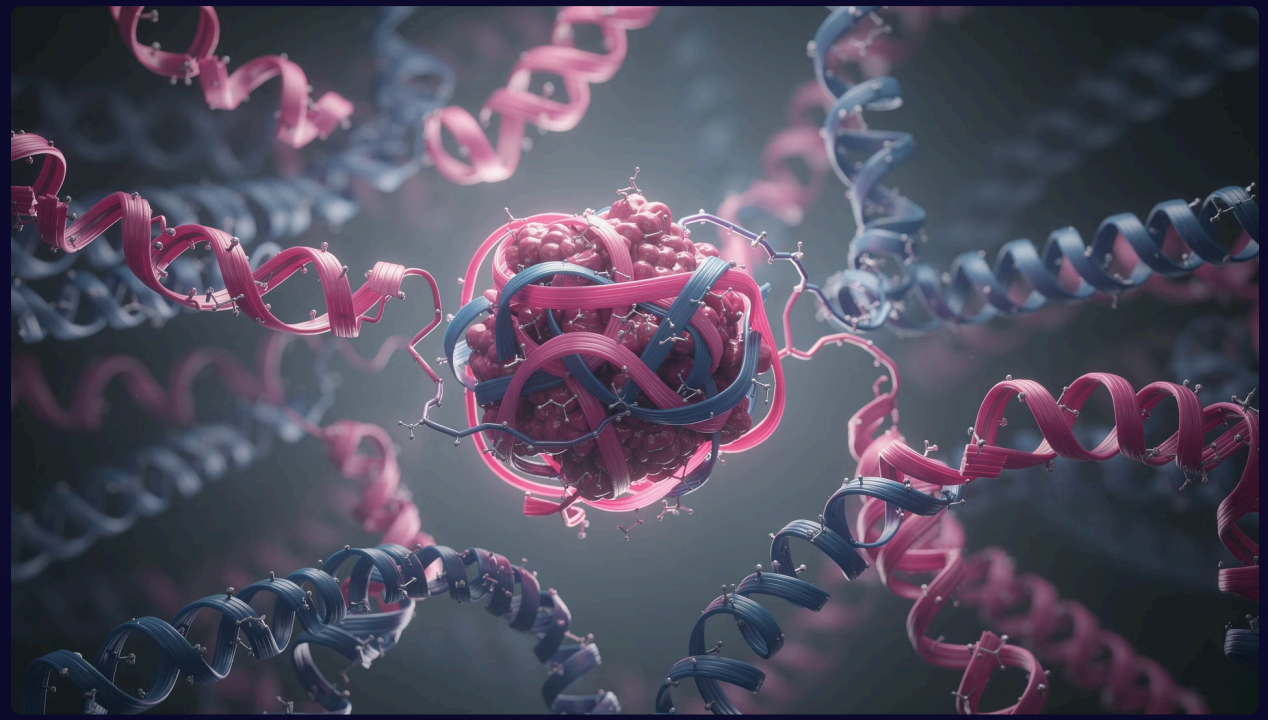
3

### NaCl (Tuz)

Beyaz, kristal, suda çözünen; sinir iletiminde ve sıvı dengesinde yaşam için elzem bir madde

Tuzun tuzluluğu, beyaz rengi ve biyolojik faydası ne sodyumda ne de klorda gizlidir; bu özellikler, iki atomun formal yüklerini dengeleyip birleştiği anda **belirir**.

# Protein Katlanması ve Levinthal Paradoksu



Proteinler işlev görebilmek için saniyeler içinde, hatasız biçimde üç boyutlu özgün yapılarına katlanmak zorundadır.

Amino asit yan zincirleri arasındaki formal yük etkileşimleri, hidrofobik kuvvetler ve hidrojen bağları bu katlanmayı yönlendiren fiziksel sebeplerdir. Ancak "deneme-yanılma" mantığının bu sistemi tek başına açıklayamayacağı matematiksel olarak ortadadır.

### Olası Konformasyon Sayısı

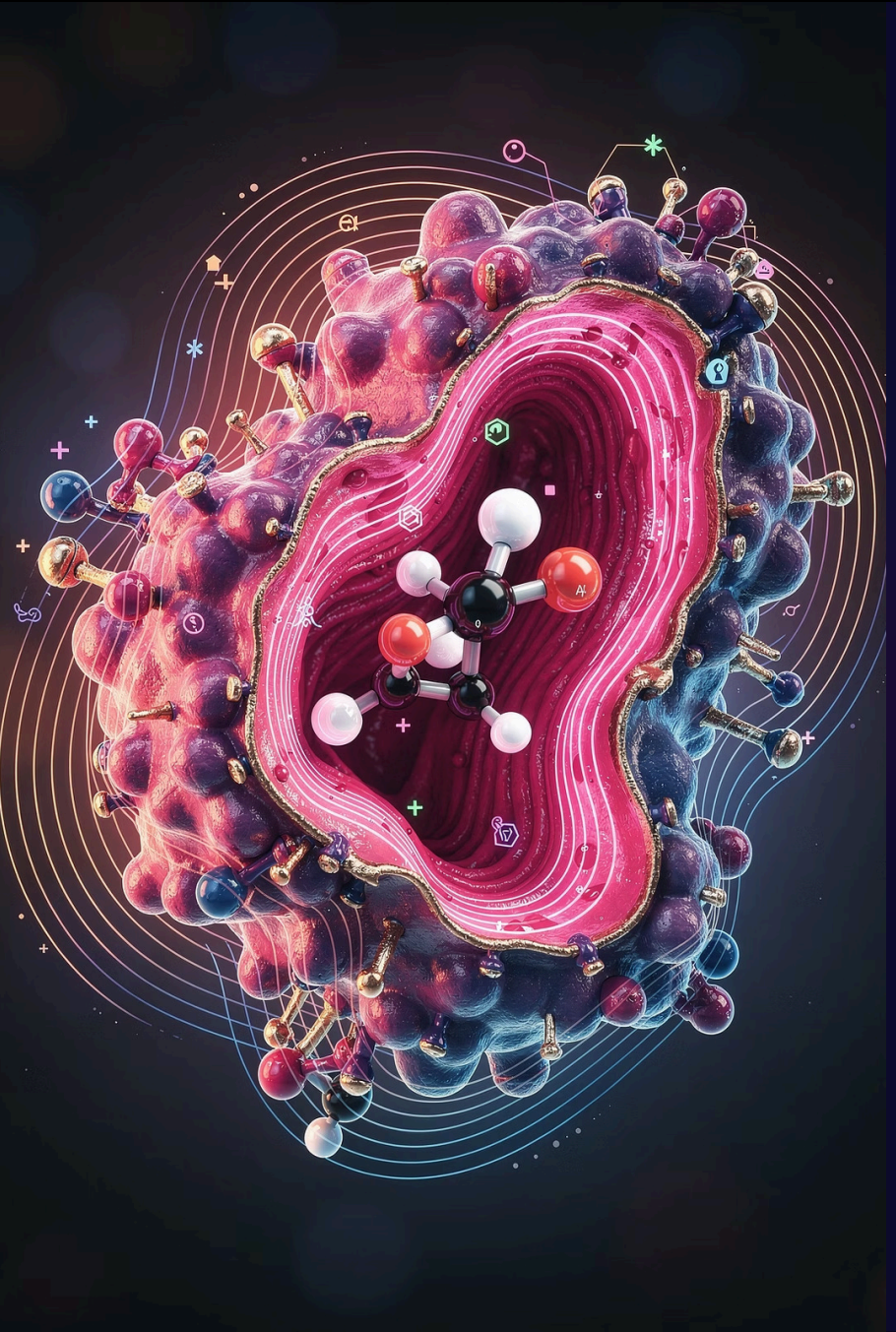
100 amino asitlik bir proteinin olası konformasyon sayısı $\approx 10^{300}$

### Rastgele Tarama Süresi

Bu olasılıkları rastgele tararken geçecek süre, evrenin yaşından trilyonlarca kat daha uzun olurdu

### Gerçek Katlanma

Gerçekte proteinler milisaniyeler veya mikrosaniyeler içinde katlanır



# Enzimlerdeki Elektrostatik Ön Organizasyon

Enzimler, vücut sıcaklığında gerçekleşmesi imkansız reaksiyonları milyonlarca kat hızlandıran moleküler makinelerdir.

01

## Önceden Hazır Elektrik Alan

Enzimin aktif bölgesindeki elektrik alanlar (katalitik alanlar), reaksiyon henüz başlamadan, reaksiyonun zirve noktasındaki yük dağılımına uygun biçimde düzenlenmiş olarak bulunur

02

## Mükemmel Uyum Kalıbı

Enzim, reaksiyon gerçekleşmeden o reaksiyonun en zorlu anına mükemmel uyum sağlayan bir "kalıp" sunar

03

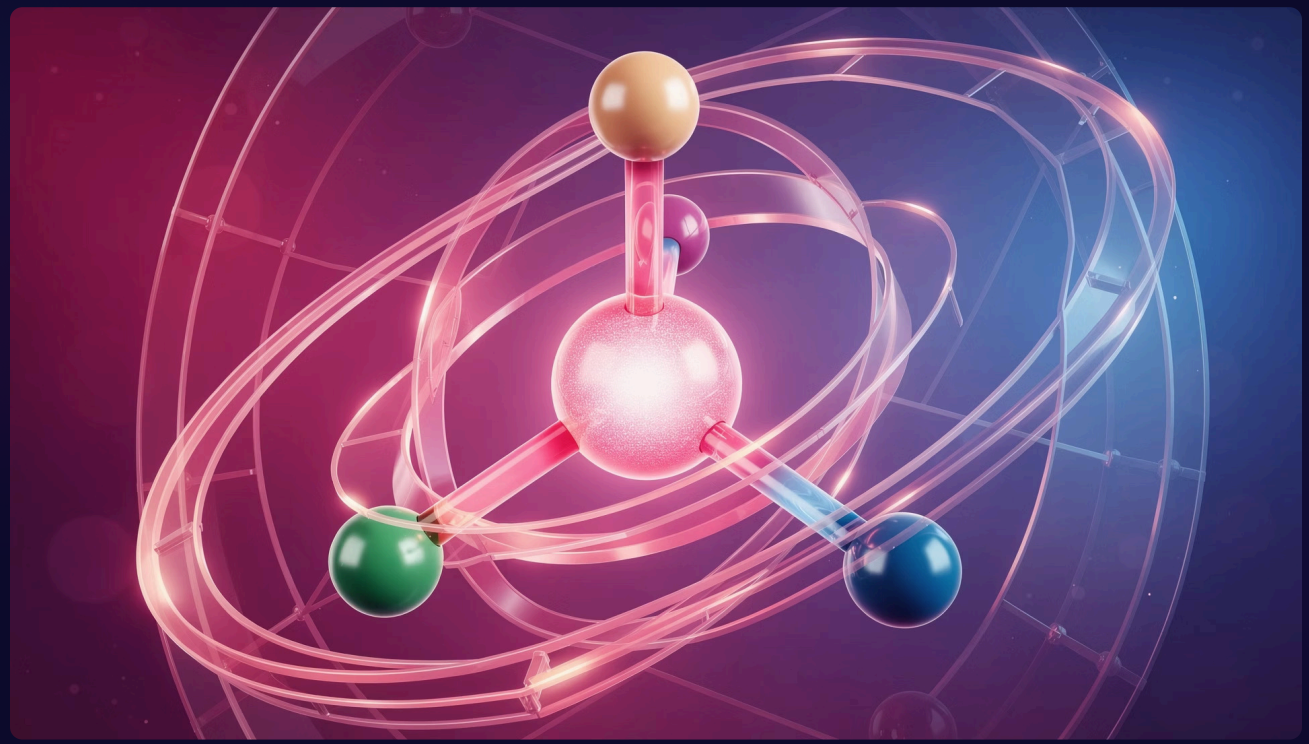
## Formal Yükün Kodlanması

Bu "önceden hazırlık" durumu, formal yük prensiplerinin moleküler makinelere nasıl kodlandığını gösterir

# Karbonun "Tam Kıvamında" Bağları

Karbon, formal yük prensipleri gereği 4 bağ yapabilme kapasitesiyle yaşamın omurgasını oluşturmak üzere tasarlanmıştır.

- C–C bağları ne çok güçlüdür (kırılmaz olurdu) ne de çok zayıftır (moleküller dağılırdı) → metastabil yapı
- DNA gibi bilgiyi saklayacak kadar sağlam, metabolizma reaksiyonlarında enerji üretecek kadar esnek
- Fizikçi Fred Hoyle, yıldızlarda karbonun sentezi için gerekli nükleer rezonans seviyelerinin hassas ayarını keşfettiğinde bu dengeyi ifade etmiştir: bu enerji seviyeleri %1 farklı olsaydı evrende karbon oluşamazdı



# Doğa Yasaları: Betimleyici mi, Yaptırımcı mı?

Kimya eğitiminde "atom kararlı olmak *ister*", "flor elektrona *açgözlüdür*" gibi ifadeler pedagojik bir kolaylık sağlar; ancak atomların şuuru, iradesi veya arzusu yoktur.

## Nancy Cartwright'ın Görüşü

Doğa yasaları olayları "yapmaz", olayların düzenli akışını "betimler"

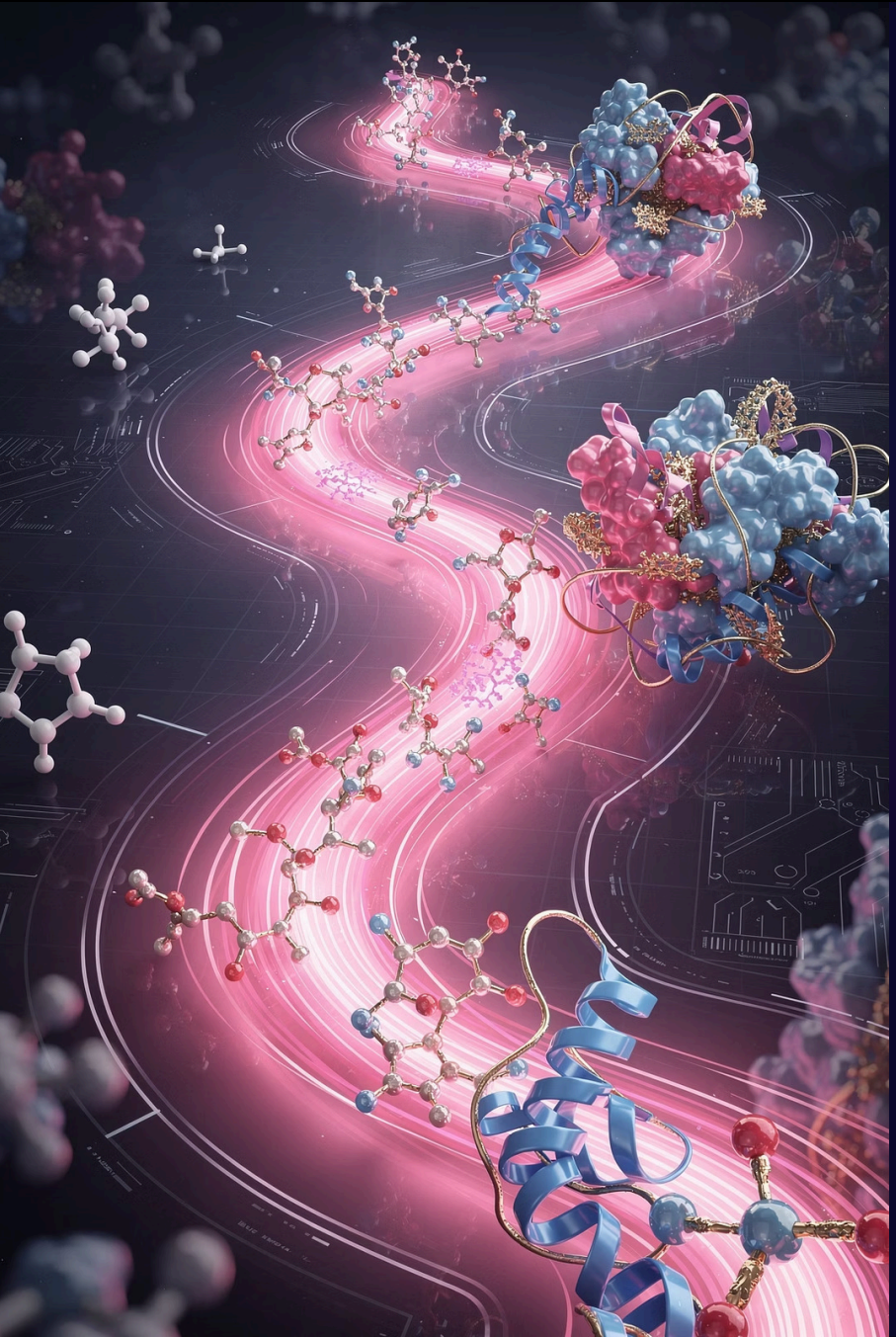
## Trafik Kuralı Analojisi

Bir trafik kuralı kitabı arabaları kendi kendine süremez; arabaların o kurala göre gitmesi şuurlu bir sürücüyü gerektirir

## Atomların Sevk Edilişi

Atomların oktet kuralına uyması, formal yüklerini dengelemesi — bunlar, atomların kendi ilmiyle değil, tabi kılındıkları yasalar çerçevesinde gerçekleşen bir sevk ediliştir

> 🤔 Yasalar, maddenin yöneticisi midir yoksa madde üzerindeki bir tasarımın tarifi mi?



# Sonuç: Madde Kitabını Okumak

Lewis yapılarından protein katlanmasına uzanan bu yolculukta her adımda ortak bir örüntü belirir.

### → Formal Yük Dengesi

Aşırılıklardan uzaklaşma, yükün en adil dağılımı

### → Suyun Geometrisi ve Karbonun Bağları

Yaşamı destekleyen hassas ayar; $H_2S$ ile farkı, tesadüfün değil ince bir tasarımın izini taşır

### → Rezonans ve Delokalizasyon

Yükün tüm yapıya yayılması, birlikten doğan kararlılık

### → Levinthal Paradoksu ve Enzim Ön Organizasyonu

"Deneme-yanılma"nın matematiksel olarak yetersiz kaldığı noktalar

Lewis yapıları basit çizim kuralları değil; kuantum mekaniksel gerçekliğin pratik yansımalarıdır ve maddenin derinliklerine kodlanmış düzeni okumak için bize verilmiş birer anahtardır.